

材料现代分析方法习题集

X 射线衍射分析习题

习 题 二

1. 名词解释：晶面指数与晶向指数、晶带、干涉面、X 射线散射、衍射与反射
2. 试画出下列晶向及晶面（均属立方晶系）： $[111]$ ， $[121]$ ， $[21\bar{2}]$ ， $(0\bar{1}0)$ ， $[110]$ ， (123) ， $(21\bar{1})$ 。
3. 下面是某立方晶系物质的几个晶面，试将它们的面间距从大到小按次序重新排列： $(12\bar{3})$ ， (100) ， (200) ， $(\bar{3}11)$ ， (121) ， (111) ， $(\bar{2}10)$ ， (220) ， (130) ， (030) ， $(2\bar{2}1)$ ， (110) 。
4. 证明 $(\bar{1}10)$ 、 $(\bar{1}21)$ 、 $(\bar{3}21)$ 晶面属于 $[111]$ 晶带。
5. 判别下列哪些晶面属于 $[\bar{1}11]$ 晶带： $(\bar{1}\bar{1}0)$ ， $(\bar{2}\bar{3}1)$ ， (231) ， (211) ， $(\bar{1}01)$ ， $(1\bar{3}3)$ ， $(1\bar{1}2)$ ， $(1\bar{3}2)$ ， $(0\bar{1}1)$ ， (212) 。
6. 晶面 (110) 、 (311) 、 (132) 是否属于同一晶带？晶带轴是什么？再指出属于这个晶带的其他几个晶面。
7. 试计算 $(\bar{3}11)$ 及 $(\bar{1}\bar{3}2)$ 的共同晶带轴。
8. 试述布拉格公式 $2d\sin\theta=\lambda$ 中各参数的含义，以及该公式有哪些应用？
9. 试述获取衍射花样的三种基本方法？它们的应用有何不同？
10. 当 X 射线在原子列上发射时，相邻原子散射线在某个方向上的

波程差若不为波长的整数倍，则此方向上必然不存在放射，为什么？

11. 当波长为 λ 的 X 射线在晶体上发生衍射时，相邻两个 (hkl) 晶面衍射线的波程差是多少？相邻两个 HKL 干涉面的波程差又是多少？

12. “一束 X 射线照射一个原子列（一维晶体），只有镜面反射方向上才有可能产生衍射线”，此种说法是否正确？

13. α -Fe 属立方晶系，点阵参数 $a=0.2866\text{nm}$ 。如用 CrK_α X 射线 ($\lambda=0.2291\text{nm}$) 照射，试求 (110)、(200) 及 (211) 可发生衍射的掠射角。

14. 画出 Fe_2B 在平行于 (010) 上的部分倒易点。 Fe_2B 属正方晶系，点阵参数 $a=b=0.510\text{nm}$ ， $c=0.424\text{nm}$ 。

材料现代分析方法习题集

X 射线衍射分析习题

习 题 三

1. 名词解释：结构因子、多重因子、罗伦兹因子、系统消光
2. 原子散射因数的物理意义是什么？某元素的原子散射因数与其原子序数有何关系？
3. 总结简单点阵、体心点阵和面心点阵衍射线的系统消光规律。
4. 洛伦兹因数是表示什么对衍射强度的影响？其表达式是综合了哪几个方面考虑而得出的？
5. 多重性因数的物理意义是什么？某立方系晶体，其 {100} 的多重性

因数是多少？如该晶体转变成四方晶系，这个晶面族的多重性因数会发生什么变化？为什么？

6. 多晶体衍射的积分强度表示什么？今有一张用 $\text{CuK}\alpha$ 摄得的钨（体心立方）的德拜图相，试计算出头 4 根线的相对积分强度（不计算 $A(\theta)$ 和 e^{-2M} ，以最强线的强度为 100）。头 4 根线的 θ 值如下：

线 条	θ
1	20.2°
2	29.2°
3	36.7°
4	43.6°

7. 试述衍射强度公式中各参数的含义？

8. 对于晶粒直径分别为 100, 75, 50, 25nm 的粉末衍射图形，请计算由于晶粒细化引起的衍射线宽化幅度 B 。（设 $\theta=45^\circ$, $\lambda=0.15\text{nm}$ ）。

对于晶粒直径为 25nm 的粉末，试计算： $\theta=10^\circ$ 、 45° 、 80° 时的 B 值。

9. 某斜方晶体晶胞含有两个同类原子，坐标位置分别为： $(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, 1)$ 和 $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{2})$ ，该晶体属何种布拉菲点阵？写出该晶体 (100)、(110)、(211)、(221) 等晶面反射线 F^2 值。

10. 说明原子散射因子 f 、结构因子 F 、结构振幅 $|F|$ 各自的物理意义。

11. 多重性因子、吸收因子及温度因子是如何引入多晶体衍射强度公式？衍射分析时如何获得它们的值？

12. 金刚石晶体属面心立方点阵，每个晶胞含 8 个原子，坐标为： $(0, 0, 0)$ 、 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$ 、 $(\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2})$ 、 $(0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ 、 $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ 、 $(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})$ 、 $(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{1}{4})$ 、 $(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ 。

$\frac{3}{4}, \frac{1}{4}$)、 $(\frac{3}{4}, \frac{1}{4}, \frac{3}{4})$ 、 $(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})$ 原子散射因子 f_a ，求其系统消光规律 (F^2 最简表达式)，并据此说明结构消光的概念。

13. “衍射线在空间的方位仅取决于晶胞的形状与大小，而与晶胞中的原子位置无关；衍射线的强度则仅取决于晶胞中原子位置，而与晶胞形状及大小无关”，此种说法是否正确？

14. CuK α 射线 ($\lambda_{K\alpha}=0.154\text{nm}$) 照射 Cu 样品，已知 Cu 的点阵常数 $a=0.361\text{nm}$ ，试用布拉格方程求其 (200) 反射的 θ 角。